

# Aplicación del Método de Punto de Burbuja en el Diseño de Columnas de Destilación

Nota de Divulgación

Ing. Francisco Sánchez Mares

Maestría en Ciencias en Ingeniería Química

Instituto Tecnológico de Aguascalientes

fsanchez96@hotmail.com

Av. López Mateos 1801 Ote., Esq. Av. Tecnológico Aguascalientes, Ags.,

Tel. 9105002 Ext. 103 fax (0149) 700423 C.P.20256

## Resumen

El presente trabajo muestra la aplicación del método riguroso de punto de burbuja en el diseño de una columna de destilación de diez etapas. Como resultado se obtienen los perfiles de temperatura, composición, carga térmica y de constantes de equilibrio a través de cada plato que integra la columna.

## Palabras Clave

Columna de destilación, método riguroso de punto de burbuja, diseño de columna de destilación.

## Introducción

El diseño de las columnas de destilación ha acaparado la atención de diversos investigadores debido a su importancia en un alto número de procesos químicos.

Los métodos de diseño de columnas de destilación se pueden clasificar en tres tipos: métodos gráficos, métodos aproximados y métodos rigurosos.

Los métodos gráficos y aproximados solo son válidos para el estudio de casos sencillos, tales como la destilación binaria y para el estudio de diseños preliminares. El diseño final del equipo requiere una determinación rigurosa de temperaturas, presiones, flujos de las corrientes, composiciones y velocidades de transferencia de calor para cada etapa. Esta determinación se realiza resolviendo los balances de materia y entalpía (energía), y relaciones de equilibrio para cada etapa. Desafortunadamente, estas relaciones son ecuaciones algebraicas no lineales que interactúan entre sí fuertemente.

El objetivo de este trabajo es aplicar el método de punto de burbuja a un problema teórico de diseño de columnas de destilación y analizar los resultados generados.

## Fundamentos teóricos

Considérese un separador líquido-vapor o líquido-líquido general, continuo y en estado estacionario, con un cierto número de etapas dispuestas en cascada en contracorriente. Admítase que en cada etapa se alcanza el equilibrio entre fases y que no tiene lugar ninguna reacción química. La Figura 1 muestra el esquema en forma general de una etapa de equilibrio  $j$  para un separador líquido-vapor, donde las etapas están numeradas de arriba a abajo.

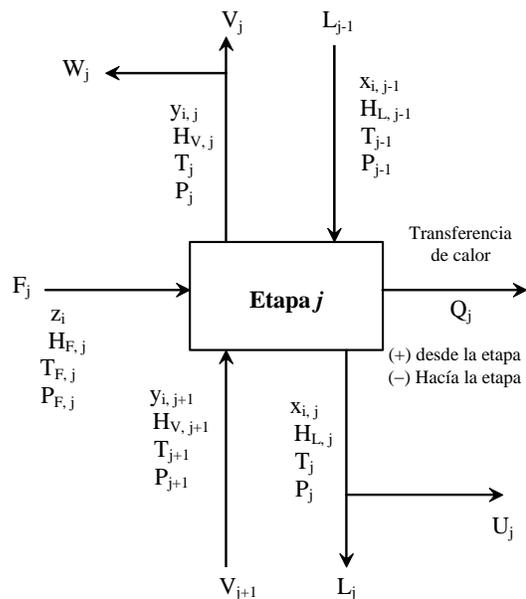


Figura 1. Etapa general de equilibrio.

En La Figura 1,  $F$  representa el flujo de alimentación,  $z_i$  es la composición de alimentación del componente  $i$ ,  $P$  es la presión,  $T$  es la temperatura,  $x$  es la fracción mol de líquido,  $y$  es la fracción mol de vapor,  $H$  es la entalpía,  $V$  es el flujo de vapor,  $L$  es el flujo de líquido,  $Q$  es el calor,  $W$  es la salida lateral de vapor y  $U$  es una salida lateral de líquido. Para los

subíndices  $F, V, L$ , se aplica la misma nomenclatura y también la siguiente:  $j$  es el número de la etapa,  $j-1$  es la etapa anterior y  $j+1$  es la etapa posterior.

Partiendo de la Figura 1 se obtienen las ecuaciones de materia, equilibrio, sumatorias, y entalpía.

1. Balances de materia para cada componente (una ecuación por componente en cada etapa).

$$M_{ij} = L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_jz_{i,j} \quad (1)$$

$$-(L_j + U_j)x_{i,j} - (V_j + W_j)y_{i,j} = 0$$

2. Relaciones de equilibrio entre fases para cada componente (una ecuación por componente en cada etapa).

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j}x_{i,j} = 0 \quad (2)$$

donde  $K$  representa la relación de equilibrio entre fases (constante de equilibrio).

3. Ecuaciones sumatorias de las fracciones molares (una para cada etapa).

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^C y_{i,j} - 1.0 = 0 \quad (3)$$

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^C x_{i,j} - 1.0 = 0 \quad (4)$$

4. Balance de energía (uno para cada etapa).

$$H_j = L_{j-1}H_{L,j-1} + V_{j+1}H_{V,j+1} + F_jH_{F,j} \quad (5)$$

$$-(L_j + U_j)H_{L,j} - (V_j + W_j)H_{V,j} + Q_j = 0$$

donde se ignoran las variaciones de energía cinética y potencial.

En lugar de (3) o (4) se puede utilizar una ecuación para el balance de materia total, la cual esta representada de la siguiente manera:

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_j \quad (6)$$

La clave del éxito del método de punto de burbuja es la formación de una matriz tridiagonal que resulta de una forma modificada de las ecuaciones (1), en las cuales se procede a tantear a partir de las otras ecuaciones, seleccionando  $T_j$  y  $V_j$  como las variables de tanteo. De esta forma las ecuaciones (1) quedan como ecuaciones lineales en las fracciones molares desconocidas en la fase líquida. Este conjunto de ecuaciones para cada componente se resuelven mediante un algoritmo de elevada eficacia

desarrollado por Tomas y aplicado por Wang y Henke (para más detalle ver Henley y Seader). Las ecuaciones modificadas de balance de materia se obtienen mediante la sustitución de (2) en (1) para eliminar  $y$  y sustituyendo (6) en (1) para eliminar  $L$ . De esta forma las ecuaciones para el cálculo de  $y$  y  $L$  se separan de las otras ecuaciones. Se obtiene así la siguiente ecuación para cada componente y etapa:

$$A_j x_{i,j-1} + B_j x_{i,j} + C_j x_{i,j+1} = D_j \quad (6)$$

donde

$$A_j = V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - U_m) - V_1 \quad (7)$$

$$2 \leq j \leq N$$

$$B_j = - \left[ V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - W_m - U_m) - V_1 + U_j + (V_j + W_j)K_{i,j} \right] \quad (8)$$

$$1 \leq j \leq N$$

$$C_j = V_{j+1}K_{i,j+1} \quad 1 \leq j \leq N-1 \quad (9)$$

$$D_j = -F_j z_{i,j} \quad 1 \leq j \leq N \quad (10)$$

donde  $N$  es el número de etapas.

La matriz tridiagonal quedará conformada de la siguiente forma:

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & A_{N-2} & B_{N-2} & C_{N-2} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & A_N & B_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{i,1} \\ x_{i,2} \\ x_{i,3} \\ \dots \\ x_{i,N-2} \\ x_{i,N-1} \\ x_{i,N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \dots \\ D_{N-2} \\ D_{N-1} \\ D_N \end{bmatrix} \quad (11)$$

El algoritmo de Tomas para la resolución del conjunto de ecuaciones linealizadas (11) es un método Gaussiano de eliminación en el que se procede inicialmente a una eliminación progresiva comenzando en la etapa 1 y operando hasta alcanzar la etapa  $N$  (última etapa), aislando finalmente  $x_{i,N}$ . Se obtienen así otros valores de  $x_{i,j}$  comenzando con  $x_{i,N-1}$  mediante una sustitución por el camino inverso.

### Método del punto de burbuja

El método desarrollado por Wang y Henke se denomina como método del punto de burbuja (BP) dado que en cada iteración se calcula un nuevo conjunto de temperaturas de las etapas a partir de las ecuaciones del punto de burbuja. En este método todas las ecuaciones son separadas y resueltas de forma secuencial, excepto las ecuaciones de balance de

materia modificadas, que se resuelven de forma separada para cada componente por el método de la matriz tridiagonal. En la Figura 2 se muestra el algoritmo para el método BP.

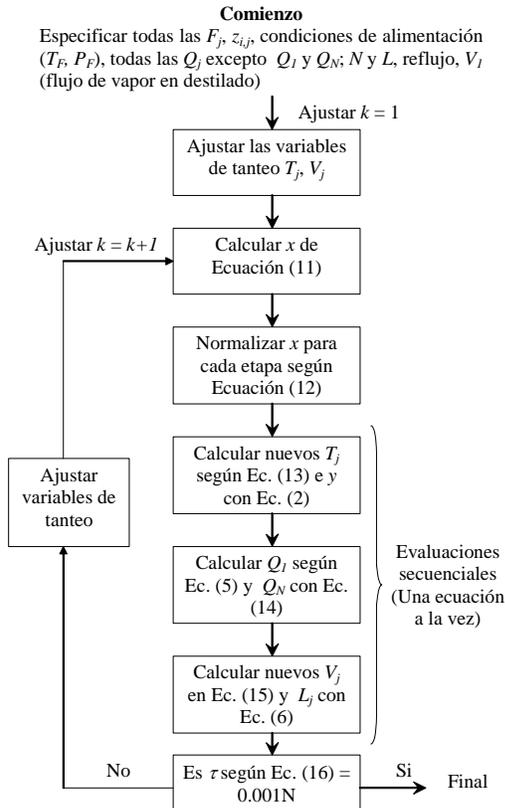


Figura 2. Algoritmo del método BP de Wang yHenke para destilación.

A continuación se presentan las ecuaciones restantes referenciadas en el algoritmo:

$$(x_{i,j})_{normalizado} = \frac{x_{i,j}}{\sum_{i=1}^C x_{i,j}} \quad (12)$$

$$\sum_{i=1}^C K_{i,j} x_{i,j} - 1.0 = 0 \quad (13)$$

$$Q_N = \sum_{j=1}^N (F_j H_{F,j} - U_j H_{L,j} - W_j H_{V,j}) - \sum_{j=1}^{N-1} Q_j - V_1 H_{V,1} - L_N H_{L,N} \quad (14)$$

$$V_j = \frac{\gamma_{j-1} - \alpha_{j-1} V_{j-1}}{\beta_{j-1}} \quad (15)$$

La cual se obtiene partiendo de la siguiente expresión:

$$\alpha_j V_j + \beta_j V_{j+1} = \gamma_j \quad (16)$$

donde

$$\alpha_i = H_{L,j-1} - H_{V,j} \quad (17)$$

$$\beta_j = H_{V,j+1} - H_{L,j} \quad (18)$$

$$\gamma_i = \left[ \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - U_m) - V_1 \right] (H_{L,j} - H_{L,j-1}) + F_j (H_{L,j} - H_{F,j}) + W_j (H_{V,j} - H_{L,j}) + Q_i \quad (19)$$

Las Ecuaciones (15) a (19) se escriben en forma de matriz diagonal de la siguiente forma:

$$\begin{bmatrix} \beta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha_3 & \beta_3 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_4 & \beta_4 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \alpha_{N-3} & \beta_{N-3} & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & \alpha_{N-2} & \beta_{N-2} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & \alpha_{N-1} & \beta_{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_3 \\ V_4 \\ V_5 \\ \dots \\ V_{N-2} \\ V_{N-1} \\ V_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_2 - \alpha_2 V_2 \\ \gamma_3 \\ \gamma_4 \\ \dots \\ \gamma_{N-3} \\ \gamma_{N-2} \\ \gamma_{N-1} \end{bmatrix} \quad (20)$$

La Ecuación matricial (20) se resuelve de forma inmediata, comenzando a resolver por la ecuación superior donde  $V_2$  es conocida, y operando hacia abajo en la misma forma, apoyándose en los valores anteriores.

$$\tau = \sum_{j=1}^N T_j^k - T_j^{k-1} \leq 0.001N \quad (21)$$

donde  $\tau$  es el criterio de paro del programa de computo.

### Materiales y métodos

El programa se implementó en el lenguaje de programación FORTRAN y el criterio de paro fue la Ecuación (21). Las propiedades de los componentes puros que integran la mezcla a evaluar se obtuvieron de Henley y Seader y la ecuación de estado cúbica empleada para el equilibrio de fases fue la de Soave-Redlich-Kwong (ver Henley y Seader):

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b)} \quad (22)$$

donde  $P$  es la presión del sistema,  $R$  la constante del gas ideal,  $T$  la temperatura absoluta,  $V$  el volumen molar y  $a, b$  parámetros promedio que dependen de las propiedades del componente puro respectivamente. Las reglas de mezclado empleadas fueron las convencionales.

Se utilizó el método aproximado Fenske-Underwood-Guilliland *FUG* (para más detalle ver Henley y Seader), para calcular el flujo en el destilado *D*, el flujo en el rehervidor *B*, el número de etapas mínimas para llevar a cabo la separación  $N_{min}$ , el reflujo mínimo  $R_{min}$ , el reflujo necesario *R*, el número de platos *N* y el plato de alimentación. A continuación se presentan los resultados obtenidos por el método *FUG* para una base de cálculo de  $F = 100$  lb mol/h

- D = 40.0206823 lb mol/h
- B o  $L_{10} = 59.9793176$  lb mol/h
- $N_{min} = 8.05278307$
- $R_{min} = 0.95468488$
- R = 4.7734244
- N = 10
- Plato de alimentación = 5

Para la estimación inicial de temperatura de la etapa 1  $T_1$  (ver Figura 3) se empleó la siguiente expresión:

$$T_1 = \left[ \sum_{i=1}^c x_{D,i} T_{c_i} \right] - 100 \quad (23)$$

donde  $x_{D,i}$  representa la fracción mol del componente *i* en el destilado y  $T_{c_i}$  es la temperatura crítica del componente *i*.

Y para la temperatura del plato número 10  $T_{10}$  (ver Figura 3):

$$T_{10} = \left[ \sum_{i=1}^c x_{B,i} T_{c_i} \right] - 100 \quad (24)$$

donde  $x_{B,i}$  representa la fracción mol del componente *i* en el fondo de la columna.

Teniendo la estimación inicial de la temperatura en el plato 1 y 10 se supuso un comportamiento lineal de las temperaturas a través de toda la columna de la siguiente forma:

$$T_j = 12.598j + 95.072 \quad (25)$$

donde  $T_j$  representa la temperatura de la etapa *j*. A continuación se presentan las estimaciones iniciales de temperatura para cada plato.

- $T_1 = 107.67056$  F
- $T_2 = 120.26893$  F
- $T_3 = 132.86730$  F
- $T_4 = 145.46671$  F
- $T_5 = 158.06404$  F
- $T_6 = 170.66241$  F
- $T_7 = 183.26078$  F
- $T_8 = 195.85915$  F

- $T_9 = 208.45752$  F
- $T_{10} = 221.05589$  F

$V_1$  fue especificado como cero,  $V_2$  como 231 lb mol/h y todos los demás  $V_j$  para la primera iteración tienen el mismo valor que  $V_2$ . La presión para todas las etapas se fija en 200 psia.

### Resultados y discusión

El problema teórico a evaluar es el siguiente:

Se va a separar por destilación una mezcla de cuatro componentes. La alimentación será líquido saturado y tendrá la siguiente composición: 40% mol de propano, 40% mol de n-butano, 10% de i-pentano y 10% de n-pentano. La corriente de destilado deberá tener el 98% de propano y ese propano será el 98% del propano alimentado (98% de recuperación). La relación de reflujo será igual a 5, el condensador será total y la presión de la columna es de 200 psia. Calcule el número de etapas de equilibrio y el plato de alimentación. La Figura 3 presenta todos los flujos necesarios para el diseño adecuado de la columna de destilación.

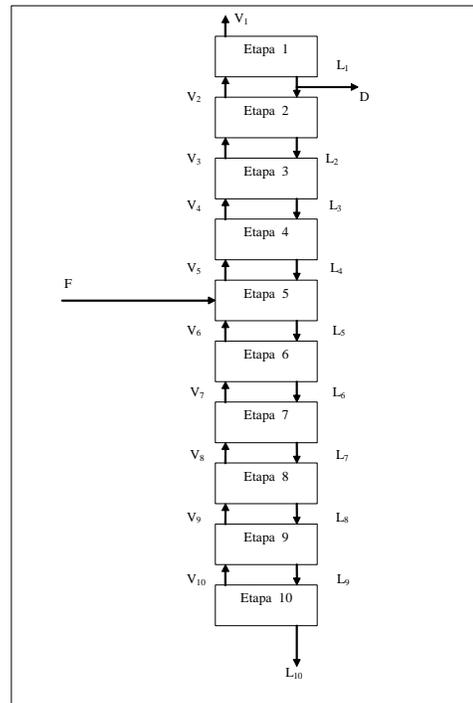


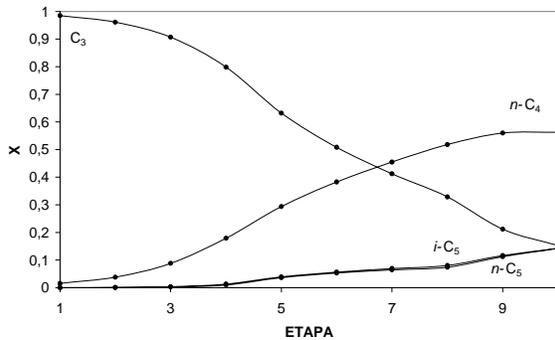
Figura 3. Flujos que componen la columna de destilación.

El programa elaborado realizó 9 iteraciones antes de converger. A continuación se presentan los valores obtenidos de temperaturas reales en cada plato de la columna:

- $T_1 = 106.699 \text{ F}$
- $T_2 = 116.801 \text{ F}$
- $T_3 = 128.796 \text{ F}$
- $T_4 = 141.746 \text{ F}$
- $T_5 = 160.767 \text{ F}$
- $T_6 = 166.800 \text{ F}$
- $T_7 = 179.776 \text{ F}$
- $T_8 = 197.698 \text{ F}$
- $T_9 = 204.899 \text{ F}$
- $T_{10} = 226.807 \text{ F}$

Se puede observar que las temperaturas obtenidas son muy cercanas a las estimadas inicialmente.

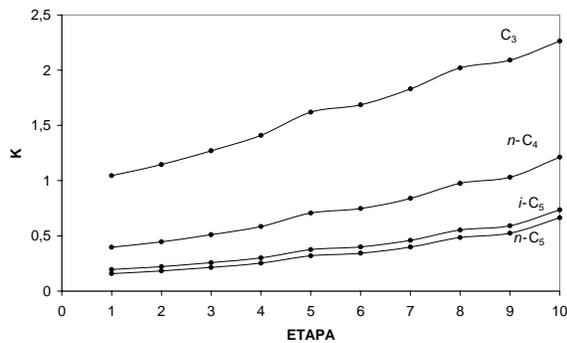
La Figura 4 esquematiza el comportamiento de la fracción mol de los componentes a través de toda la columna.



**Figura 4.** Fracción mol de los componentes de la mezcla en cada plato.

Se puede observar en la Figura 4 que el propano en el plato 1 (destilado) tiene una composición de 0.984621 y baja gradualmente hasta que en el fondo de la columna (plato 10) tiene una composición de 0.152504, es decir casi no existe en los fondos debido a que es el producto deseado de este caso de estudio.

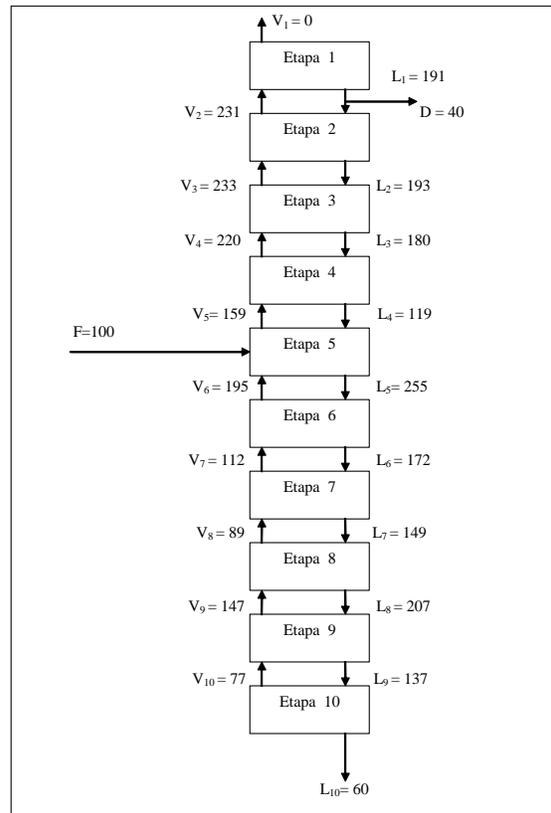
La Figura 5 presenta el comportamiento de las constantes de equilibrio  $K$  a través de todos los platos de la columna diseñada.



**Figura 5.** Comportamiento de las constantes de equilibrio  $K$  en la columna.

En la Figura 5 se observa que el componente que tiene la mayor constante de equilibrio  $K$  es el propano, esto muestra que la separación del propano de los demás componentes mediante la destilación es viable.

La Figura 6 muestra la columna de 10 platos ya con todos los flujos completos en valores redondeados.



**Figura 6.** Flujos calculados para la columna de destilación (las unidades de los flujos son lb mol/h).

La carga térmica de la etapa 1  $Q_1$  (condensador) obtenida es de 2,929,143.6057 Btu/lbmol y la carga térmica del rehervidor  $Q_{10}$  fue de -3,282,814.6616 Btu/lbmol.

### Conclusiones

El método evaluado a pesar de tener un costo computacional alto, genera resultados confiables para un diseño eficiente de una columna de destilación destinada a cualquier proceso químico.

### Referencias

[1] Ernest J. Henley y J.D. Seader (2003); *Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química*. Editorial Reverté. España